



TITLE:

多重臨界現象の数値的解法(講義ノート)

AUTHOR(S):

Fisher, M.E.

CITATION:

Fisher, M.E.. 多重臨界現象の数値的解法(講義ノート). 物性研究 1977, 29(2): 69-85

ISSUE DATE:

1977-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89430>

RIGHT:

多重臨界現象の数値的解法

M. E. Fisher

これから述べようとするのは、臨界現象における級数展開の方法を、二変数に拡張して、多重臨界点へ適用しようとするものである。

1) 一変数級数展開の方法

まず一変数の場合を考えよう。x の関数 $f(x)$ が無限級数

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

で与えられる。但し、右辺は形式的級数で収束の保証はないが、ふつうは、左辺の関数 $f(x)$ の定義とみなす。 $f(x)$ として代表的な例は、帯磁率

$$\chi(T) = \frac{\partial M}{\partial H}$$

で、 x はこの場合 J/kT である。

a) 切断法

関数 $f(x)$ を近似する昔からの方法は、係数 a_k のうち $k \leq K$ がわかっているとき、上の級数を K 次の項までで切断して

$$f(x) \simeq \sum_{k=0}^K a_k x^k$$

と近似する事である。勿論これは、大変ひどい近似で、先程の例の帯磁率が、実際に x の関数としてどのように振舞うかをみれば、ある臨界点 x_c で

$$f(x) \simeq \frac{Z_0}{(x_c - x)^r} \rightarrow \infty \quad x \rightarrow x_c$$

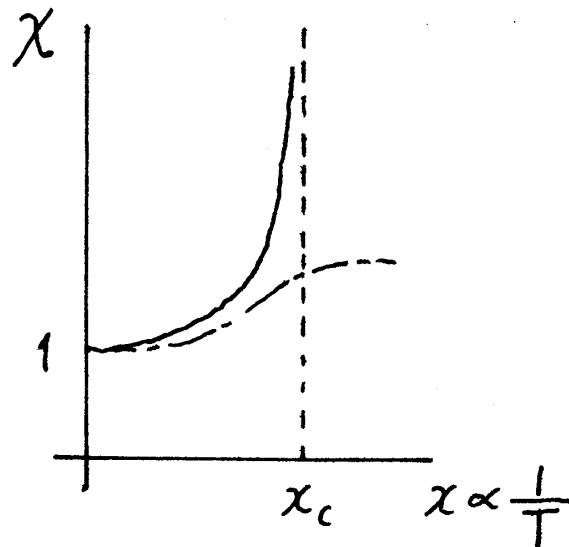


図 1

M. E. Fisher

のように指数 r で発散し、多項式（切断された級数）では表わし得ない。また我々の知りたい臨界点 x_c (Where is the singularity?), 臨界指数 r (What is the nature of the singularity?) 及び臨界振幅 Z_0 (What is the amplitude of the singularity?) の評価を与えない。まずこの方法は役に立たない。

b) 逆数関数の切断法

次に歴史的に試みられたのは、 $f(x)$ の逆数をとって、それを級数展開し K 次の項までで切断したもので

$$1/f(x) \simeq \sum_{k=0}^K b_k x^k$$

と近似する。近似多項式の零点が臨界点 x_c の評価を与える。この点では前の近似より良くなっているが、決定的に不十分なのはこの近似では常に $r=1$ となり、事実これは正しくない。従って Z_0 の評価も与えない。この方法もまた役に立たない。

これらのほかに、役に立つ近似の方法がふたつある。歴史的順序でのべると、

c) ratio method

前と同様に、級数展開の始めの K 項の係数 $\{a_k\}$ がわかっているものとする。高温帯磁率の例では、これらの係数の変化は大変規則正しい。そういう級数の場合には ratio method はよく働く。 a_k の規則正しい変化に着目して、

$$a_k/a_{k-1} \quad \text{v. s.} \quad 1/(k+\delta)$$

をプロットしてみる。ここで挿入したパラメーター δ は、外挿するとき調整する小さい数で、 n シフトとよばれている。ここでは簡単のため 0 とおく。これをみると、漸近的に

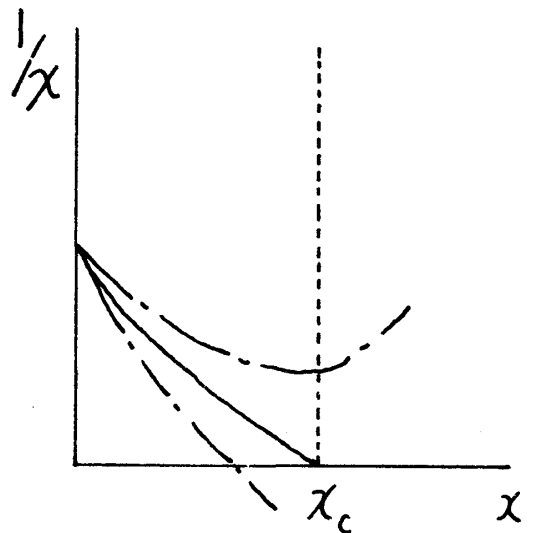


図 2

$$\frac{a_k}{a_{k-1}} \simeq \mu_0 \left[1 - \frac{g}{k} \right] \quad k \gg 1$$

が成立つのがわかる。グラフでは μ_0 が外挿された切片， $-g$ が傾きを示す。これから二項定理を用いることにより，切片から臨界点 $x_c \simeq \frac{1}{\mu_0}$ ，傾きから臨界指数 $r \simeq 1+g$ の評価が得られる。

この ratio method にはいくつかの工夫があるが，ひとつは x_c が何か別の方法で正確にわかっている場合

$$g_k = \left[1 - \frac{a_k}{\mu_0 a_{k-1}} \right] k$$

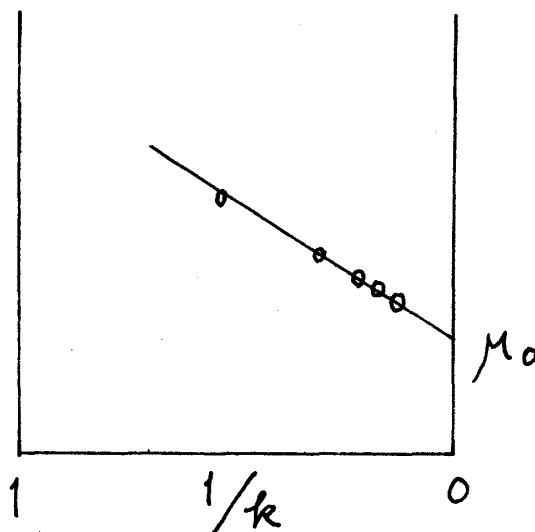


図 3

を定義すれば，数列 $\{g_k\}$ は $r-1$ に収束するはずである。また一方， r が正確にわかっているときは，

$$\mu_0^* = \frac{a_k}{a_{k-1}} \frac{k}{k-(r+1)}$$

が $\mu_0 = \frac{1}{x_c}$ へ収束するはずである。

ratio method が有用な場合は，しばしばそれが最良の方法であることが多い。例えば正方格子の Ising 模型では $r = 1.7497 \dots$ で正確な値 $7/4 = 1.75$ にほぼ一致する。単純立方格子では，正確な x_c も r も知られていないが，別の方法で見出した x_c の値を用いて r を計算すると $r = 1.2485 \dots$ となる。

ratio method が役に立たない例は，fcc 格子の 3 次元 Ising 模型の自発磁化で， $x = e^{-\frac{J}{kT}}$ として低温から級数展開すると，係数は大変不規則で上にのべたような収束は期待できない。歴史的にこの問題を解いたのは，

d) Padé approximant technique

で，規則的な級数に対しては ratio method ほど良い評価を与えないが，ratio method が役に立たない不規則な級数に対して効き目がある。

ここで，なぜ高温帯磁率の級数がそんなに収束がよく，自発磁化の級数は収束が悪い

M. E. Fisher

のかを考えてみよう。

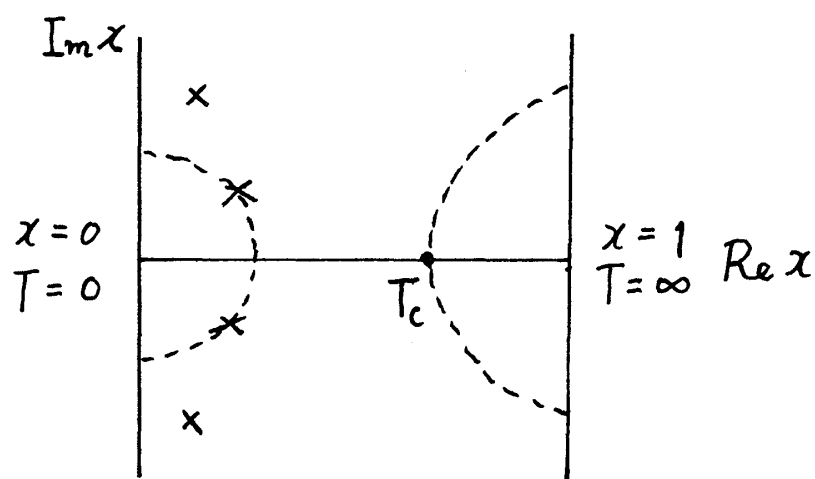


図 4

いま変数 $x = e^{-\frac{J}{kT}}$ をとり，上図のように x の複素平面で特異点の位置をながめてみると，高温展開では収束半径が，実際の T_c に対応する物理的特異点によって決まるのに対し，低温展開の場合では，物理的特異点よりも原点に近い特異点が収束半径を決めているものと考えられる。従って低温展開の本質的な問題点は，物理的特異点まで解析接続することである。これが Padé approximant によって可能となる。

関数 $f(x)$ の L/M Padé approximant は次式のようにふたつの多項式 $P_L(x)$, $Q_M(x)$ の比として定義される。

$$[L/M]_f = F_{LM}(x) = \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} \simeq f(x)$$

ここで，

$$P_L(x) = \sum_{l=0}^L p_l x^l$$

$$Q_M(x) = \sum_{m=1}^M q_m x^m \quad q_0 = 1$$

である。

$K = L + M$ であれば，

$$\frac{P_L(x)}{Q_M(x)} = \sum_{k=0}^K a_k x^k + O(x^{K+1})$$

が成立ち、 $Q_M(x)$ を両辺にかけて、 x の各次数の係数比較によって $\{a_0 a_1 \dots a_K\}$ から $\{p_0 p_1 \dots p_L q_1 \dots q_M\}$ を求めることが出来る。このように Padé approximant の係数を決めることは、連立 1 次方程式の問題で、計算機を使って数値的に解ける。ここで注意しなければならないのはその行列式が非常に小さくなる時、つまり方程式が singular に近いときで、この場合は倍精度を使わなければならない。この点は ratio method よりも手数がかかる。

さて Padé approximant が役に立つ点は、まず分母 $Q_M(x)$ をもつ事で、 $Q_M(x)$ の零点 x_0 が $F_{LM}(x)$ の極を与える。従って x_0 付近では、留数を A_0 として、

$$F_{LM}(x) \simeq \frac{A_0}{(x-x_0)^n} \quad (n \text{ 位の極})$$

のように振舞う。

この方法は初めのふたつの近似、つまり単純な切断法と逆数関数の切断法を、特殊な場合として含んでいる。 $M=0$ の場合が前者、 $L=0$ の場合が後者にあたる。

L/M Padé の表のうち対角線 $L=M$ 上またはその付近の approximants がよく使われる。なぜならそれらは、分子と分母の零点、すなわち $F_{LM}(x)$ の零点と極の特異点を両方とも与える。もし関数 $f(x)$ が有理型関数つまり、特異点が零点と極に限られる場合は、Padé approximant の収束は大変速い。

しかし、帯磁率の例では、 $f(x)$ は単に極を特異点にもつのではなく、

$$f(x) = \frac{Z_0}{(x_c - x)^r} \quad r \text{ は一般に整数ではない}$$

のように cut をもつ。従ってこのとき、単純な Padé approximant は役に立たない。Padé approximant が特異点をどのように近似しているかを複素 x 平面でみると、ほんとうの特異点 (cut) が第 5 図の左図のようだとすると、Padé 近似は第 5 図の右図のような零点と極の並んだものでそれをおきかえる。cut の近傍では近似は悪くなるが、それ以外ではよく、特に収束半径を決める x_c は、よく近似できる。

G. Baker は上のような cut をもつ関数の場合は、直接その Padé approximant を

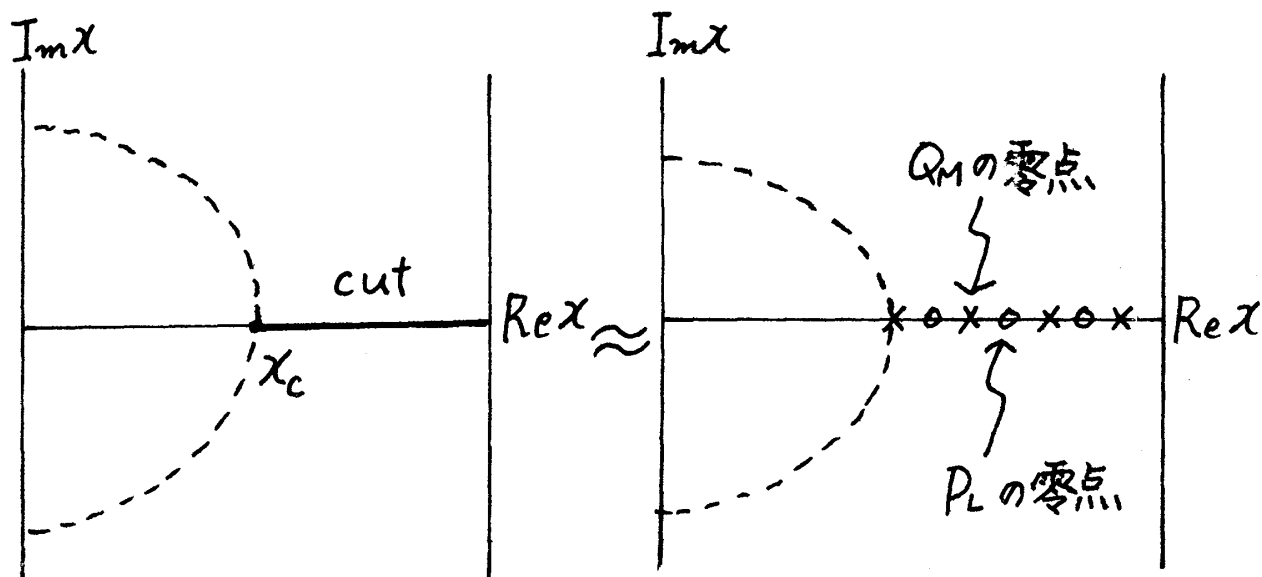


図 5

とるのではなく， $f(x)$ の対数微分

$$D(x) = \frac{d}{dx} \log f(x)$$

の Padé approximant を考えればよい事を示した。実際，上の例でも

$$D(x) = \frac{r}{x_c - x}$$

となり， $f(x)$ が cut をもっても $D(x)$ は極だけとなる。これはふつう D-log Padé approximant とよばれるもので

$$D(x) \simeq [L/M]_{D \log f} = \frac{P_L(x)}{Q_M(x)}$$

で定義され， $D(x)$ の特異点が極だけなら収束も速いはずである。（ \log の特異点の場合，収束はおそくなる。）上の例からわかるように， $Q_M(x)$ の零点で実軸上で原点に最も近いものが臨界温度 T_c を与え，その極での留数が臨界指数 r を与える。

もし x_c がわかっているときは

$$r^*(x) = (x_c - x) \frac{d}{dx} \log f(x)$$

に対する級数から Padé approximant を作り，それを $x = x_c$ とおけば r の評価が得られる。また r がわかっているときには

$$f(x)^{1/r}$$

に対する Padé approximant から x_c が得られる。もし、 r と x_c が両方わかれば、

$$A(x) = f(x) (x - x_c)^r$$

から、臨界振幅 Z_0 の評価が得られる。

これらの方法を用いて、2次元 Ising 模型の高温帯磁率は diagonal Padé approximant で大変速く Onsager の値 x_c , r に収束することがわかっている。3次元 Ising 模型の場合も $x_c = 0.21815 \dots$ $r = 1.2505 \dots$ が得られ、これはくりこみ群による方法が適用される以前に、より正確にわかっていた値である。

自発磁化の級数は大変不規則であるが Padé approximant によって $\beta = 0.31 \dots$ が歴史的に最初に見出された。

2) 二変数級数展開の方法

二変数 x, y の関数 $f(x, y)$ が、

$$f(x, y) = \sum_{k, k'=0}^{\infty} a_{k, k'} x^k y^{k'}$$

で与えられている。いま我々は (k, k') のうち有限な K 個だけわかっているものとする。そのことを、係数の index set を K として

$$(k, k') \in K$$

と表わそう。ここで、領域 K の選び方が同じ K でもいろいろあり、幾何学的複雑さを増すことを注意しておこう。

$f(x, y)$ の代表例として、帯磁率 $\chi(T, H)$ を考えると、変数として、

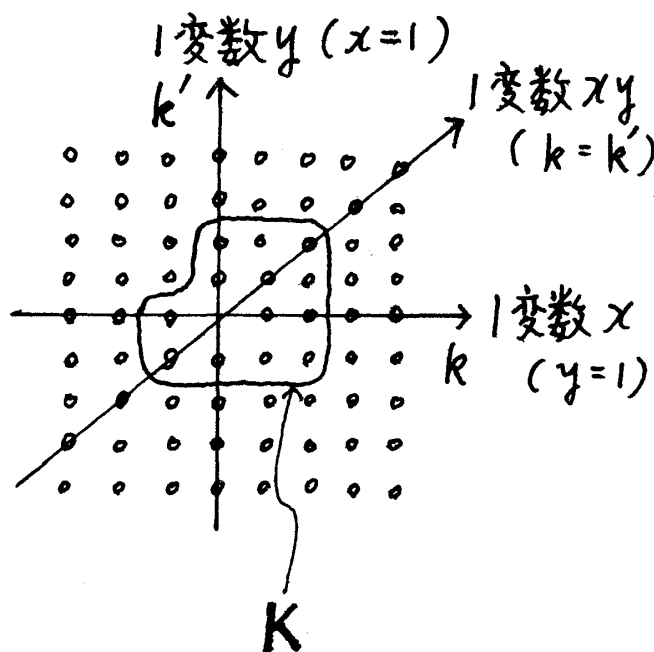


図 6

$$x = J/kT \quad y = H/kT$$

をとり、実際の振舞いを xy 平面でみると、
ふつうの臨界現象では臨界点 x_c は磁場 0 で
おこるので、特異点は図のように x 軸上 $x \geq$
 x_c でおこる。この場合、臨界点付近での
 $f(x, y)$ の振舞いをしらべるには、

$$f(x, 0), \quad \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right|_{y=0},$$

$$\left. \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \right|_{y=0}, \quad \dots\dots$$

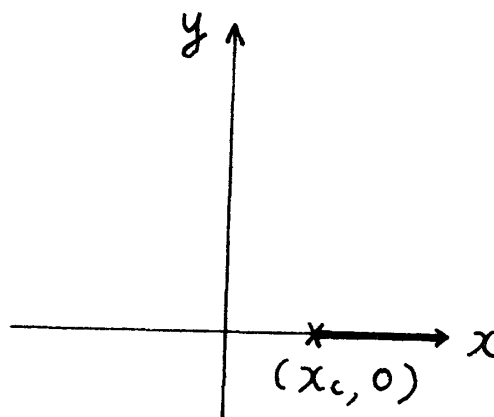


図 7

をとれば、これらはすべて一変数 x の関数だから、これまでにのべた一変数の方法を使うことができる。実際多くの仕事がこの方面でなされている。

多重臨界点が存在する場合は、状況はもっと複雑になる。

二重臨界点 (bi critical point) では、特異点は xy 平面上で第 8 図左図のように分布し、三重臨界点 (tricritical point) では、第 8 図右図のようになる。

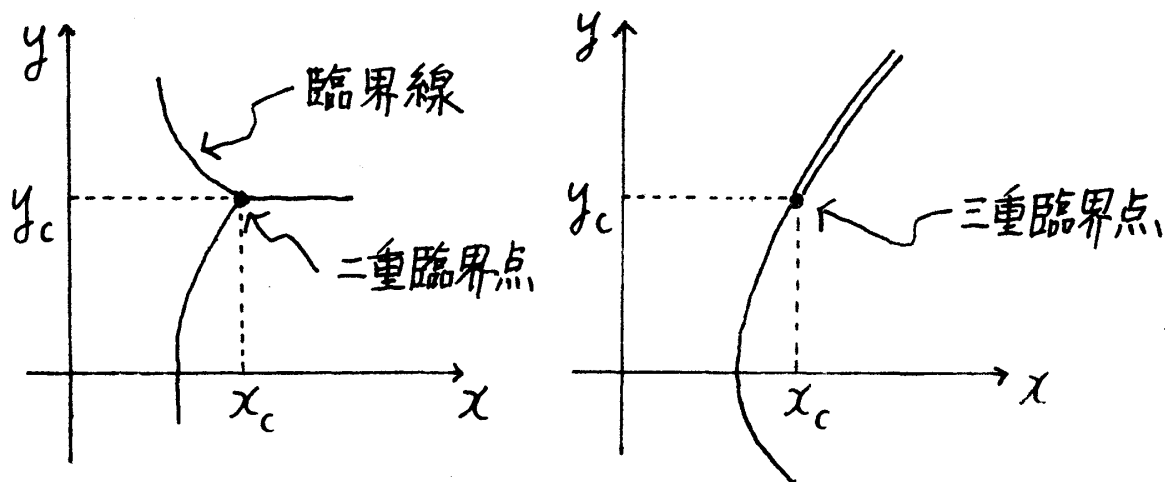


図 8

我々は多重臨界点 (x_c, y_c) の位置と、その近傍での $f(x, y)$ の振舞いが知りたい。
さらに二変数の場合、臨界点付近で $f(x, y)$ は次のような scaling の性質

$$f(x, y) = \frac{1}{(x_c - x)^r} Z\left(\frac{y_c - y}{(x_c - x)^\phi}\right)$$

をもつと予想して、臨界点 (x_c, y_c) ，ふつうの臨界指数 r と crossover 指数 ϕ を求めたい。臨界振幅 $Z(z)$ は，もはや一般に定数ではなく，指数 ϕ をもった scaling 関数となる。

我々はさらに，波印のついた坐標軸

$$\begin{cases} \widetilde{x} = \Delta x - \frac{\Delta y}{e_2} \\ \widetilde{y} = \Delta y - e_1 \Delta x \end{cases} \quad \begin{cases} \Delta x = x - x_c \\ \Delta y = y - y_c \end{cases}$$

を導入し， $f(x, y)$ が臨界点付近で，

$$f(x, y) = \frac{1}{|\widetilde{x}|^r} Z\left(\frac{\widetilde{y}}{\widetilde{x}^\phi}\right)$$

と書かれる事を予想する。 e_1, e_2 は scaling axis の傾きである。

従って我々が解こうとする問題は，二変数の級数展開を用いて，どうすれば多重臨界現象の scaling の性質が記述でき，しかも， (x_c, y_c) ， $r, \phi, e_1, e_2, Z(z)$ が数値的に求められるか，である。

a) Canterbury approximant

級数展開の二変数への拡張は，はじめに Chisholm とその共同者によってなされた。関数 $f(x, y)$ の Canterbury approximant は一変数 Padé approximant の自明な一般化によってなされる。

$$F_{\mathbf{LM}}(x, y) = \frac{P_{\mathbf{L}}(x, y)}{Q_{\mathbf{M}}(x, y)} \simeq f(x, y)$$

ここで，

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{L}}(x, y) &= \sum_{(\ell, \ell') \in \mathbf{L}} p_{\ell \ell'} x^\ell y^{\ell'} \\ Q_{\mathbf{M}}(x, y) &= \sum_{(m, m') \in \mathbf{M}} q_{m m'} x^m y^{m'}, \quad q_{00} = 1 \end{aligned}$$

M. E. Fisher

である。

$K = L + M - 1$ のとき,

$$\frac{P_L(x, y)}{Q_M(x, y)} \simeq \sum_{(k, k') \in K} a_{kk'} x^k y^{k'}$$

より, 係数比較によって $\{a_{kk'}\}$ から $\{p_{ll'}, q_{mm'}\}$ を求めることができる。但し, ここで注意しなくてはならないのは, $K = L + M - 1$ をみたす領域 K, L, M の選び方にはいろんな仕方があり, それによって近似の誤差が異って来る。どうすれば最良の幾何が得られるかについては, 多くの議論が Proc. Roy. Soc. に出ている。しかし, これらの微妙な点に関わるまでもなく, この直接的な一般化は我々の問題に対しては役に立たない。

それは Canterbury approximant $F_{LM}(x, y)$ が どのような特異点をもちうるかをみるとわかる。 $Q_M(x, y)$ の零点は xy 平面で $F_{LM}(x, y)$ の極の trajectory $y(x)$ を与える。これは臨界線と考えてよいが, この方法では代数曲線しか出てこない。これは多重臨界点では正しくない。一方散乱理論では Canterbury approximant は自動的にユニタリ性をみたすので, Bom 近似などよりも有効であることがわかっている。しかし我々の問題には役に立たない。

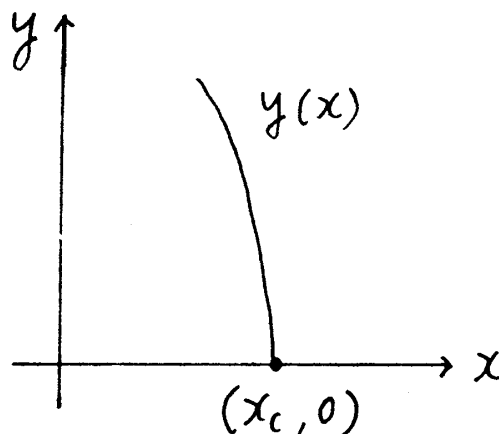


図 9

一変数のときのように, D-log Padé approximant

$$D_X(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} \log f(x, y) \simeq \frac{P_L(x, y)}{Q_M(x, y)}$$

を作ってみると, 極をもつことが予想される因子 $1/(x_c - x)^r$ はよいが, $Z(z)$ が関数であるために単純な特異点を予想できない。従って $Z(z)$ が定数とみなしてよいような, 臨界線のなめらかな部分に対しては適用できるが, 指数 ϕ で記述されるような scaling は取扱えない。また, 多重臨界現象も取扱えない。たとえば, 二重臨界点では三つの異

る指数が付随して臨界線が交わっている。

b) PQR approximant (partial differential approximant)

上の状況をきりぬけるには新しい着想が必要である。私はそれを数年前、マルセイユの会合でフランスのグループに、二変数 Padé approximant の困難さを説明しているときに得た。

scaling の性質が次のように成立していたとしよう。

$$f(x, y) = \Delta x^{-r} Z\left(\frac{\Delta y}{\Delta x^\phi}\right)$$

いま変数 x, y に関する偏微分を考える。

$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x} = -r \Delta x^{-r-1} Z - \phi \Delta x^{-r-\phi-1} \Delta y Z'$$

$$f_y = \frac{\partial f}{\partial y} = \Delta x^{-r-\phi} Z'$$

これより Z' を消去すると

$$-r f = \Delta x f_x + \phi \Delta y f_y$$

を得る。

この式を次のように書きかえよう。

$$P_c f = Q_c \frac{\partial f}{\partial x} + R_c \frac{\partial f}{\partial y}$$

ここで、

$$P_c = -r, \quad Q_c = x - x_c, \quad R_c = \phi(y - y_c)$$

とおけば、前の式が得られる。

上式は $f(x, y)$ が線型一階偏微分方程式の解である事を示している。係数は P_c が定数, Q_c が x の 1 次式, R_c が y の 1 次式で, それらは臨界指数 r, ϕ と関係づけられる。

この着想は、明らかに次のように一般化できる。係数 P_c, Q_c, R_c を, 三つの多項式

M. E. Fisher

$P(x, y)$, $Q(x, y)$, $R(x, y)$ へ拡張しよう。

関数 $f(x, y)$ の PQR approximant (または partial differential approximant)
 $F_{\mathbf{LMN}}(x, y)$ または簡単に $[\mathbf{L}, \mathbf{M}, \mathbf{N}]$ は二変数の線型一階偏微分方程式

$$P_{\mathbf{L}}(x, y) F_{\mathbf{LMN}}(x, y) = Q_{\mathbf{M}}(x, y) \frac{\partial F_{\mathbf{LMN}}(x, y)}{\partial x} + R_{\mathbf{N}}(x, y) \frac{\partial F_{\mathbf{LMN}}(x, y)}{\partial y}$$

の解で定義される。ここで,

$$P_{\mathbf{L}}(x, y) = \sum_{(\ell, \ell') \subset \mathbf{L}} p_{\ell \ell'} x^{\ell} y^{\ell'}, \quad p_{00} = 1$$

$$Q_{\mathbf{M}}(x, y) = \sum_{(m, m') \subset \mathbf{M}} q_{m m'} x^m y^{m'}$$

$$R_{\mathbf{N}}(x, y) = \sum_{(n, n') \subset \mathbf{N}} r_{n n'} x^n y^{n'}$$

である。係数 $\{p_{\ell \ell'}, q_{m m'}, r_{n n'}\}$ を

$$F_{\mathbf{LMN}}(x, y) \simeq f(x, y)$$

となるように選ぶわけであるが, $K = L + M + N - 1$ のとき, 上の偏微分方程式に

$$F_{\mathbf{LMN}}(x, y) = \sum_{(k, k') \subset \mathbf{K}} a_{k k'} x^k y^{k'}$$

を代入して, 係数比較によって決める。計算は複雑をきわめるが本質的には連立一次方程式の計算であり, Padé のときと同じである。

さて, この PQR approximant はどのように役に立つのだろうか。関数 $f(x, y)$ が, scaling の性質をみたすならば, 臨界点近傍で $P_{\mathbf{L}}(x, y)$ は定数になり, $Q_{\mathbf{M}}(x, y)$ は $x - x_c$ に, $R_{\mathbf{N}}(x, y)$ は $y - y_c$ に比例して零になるから, $Q_{\mathbf{M}}(x, y)$ と $R_{\mathbf{N}}(x, y)$ の零点から (x_c, y_c) が求められ, 比例係数から指数 τ, ϕ , が求められる。

ところで, 阿部教授と氷上氏は, 上の方程式が Callan-Symanzik 方程式にほかならない事を指摘された。Callan-Symanzik 方程式では上の変数 x, y はいろんな結合定数であり, 同じ型の偏微分方程式の係数の関数の零点が議論される。

この事情をもう少しくわしくみるために, xy 平面で $Q(x, y) = 0$, $R(x, y) = 0$

の曲線を描いてみよう。

共通零点を (x_0, y_0) として、その近傍で次のように展開する。

$$Q(x, y) = Q_1 \Delta x + Q_2 \Delta y$$

$$R(x, y) = R_1 \Delta x + R_2 \Delta y$$

ここで、 $\Delta x = x - x_0$, $\Delta y = y - y_0$,

$$Q_1 = \left. \frac{\partial Q(x, y)}{\partial x} \right|_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} \text{ 等である。}$$

共通零点 (x_0, y_0) は多重臨界点 (x_c, y_c) の評価を与える。

ふたつの scaling axis の傾き e_1 , e_2 は次の二次方程式の二根として得られる。

$$Q_2 e^2 + (Q_1 - R_2)e - R_1 = 0$$

また、臨界指数に対しては、

$$\phi \simeq \frac{R_2 - e_1 Q_2}{Q_1 - R_1/e_2}, \quad r \simeq \frac{-P_0}{Q_1 - R_1/e_2} \quad \text{ただし, } P_0 = P(x_0, y_0)$$

という評価を与える。

この PQR approximant は一変数の場合の D-log Padé approximant の一般化になっていることが次のようにしてわかる。D-log での関数 $D(x)$ を P/Q とおけば

$$Pf = Q \frac{df}{dx}$$

と書くことができ、これは PQR で R を恒等的に 0 とおいた事に対応している。つまり PQR では、二変数への一般化

$$Pf = Q \frac{\partial f}{\partial x} + R \frac{\partial f}{\partial y}$$

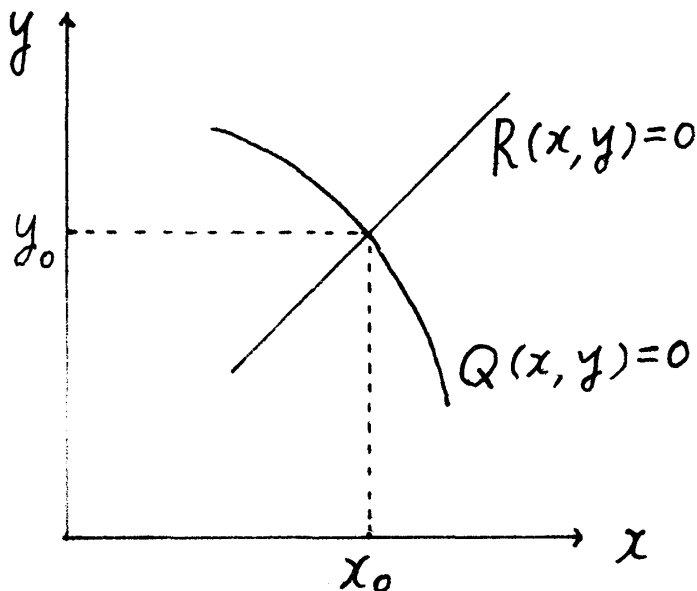


図 10

M. E. Fisher

を行ったことになる。結合定数が多くある場合の Callan-Symanzik 方程式はさらに

$$Pf = \sum_j Q_j \frac{\partial f}{\partial x_j}$$

へと一般化したことになる。このときは scaling parameter の数も多くなり、一層複雑な方程式である。

我々は D-log Padé approximant を二変数まで拡張することによって scaling 現象—それは臨界現象よりも一般化された数学的現象である—が記述できるようになった。別の言い方をすれば、上の偏微分方程式は scaling 解をもつ。

また、Canterbury approximant が正確に解く例

$$f(x, y) = \frac{1}{(1-2x+y)^r} + e^{x-2y}$$

は PQR approximant でも正解に解ける事がわかっている。さらに、

$$f(x, y) = [A(x, y) + B(x, y)]^\zeta$$

という形の関数で $A(x, y)$, $B(x, y)$ がいずれも

$$c_0 \prod_{j=1}^J [c_j(x, y)]^{r_j} \exp \left[\frac{c_0(x, y)}{c_{0j}(x, y)} \right]$$

ただし、

$$c_j(x, y), c_0(x, y), c_{0j}(x, y) \text{ は任意の多項式}$$

の形で書けると、PQR approximant で正確に解ける。この式が既に複雑であることからわかるように、一般に scaling 解がどのような形をもつか知る事は大変むづかしい。

scaling 関数 $Z(z)$ を求めるには、特性曲線の方法を用いる。“時間”変数 τ を導入しよう。これはくりこみ群の block size にあたる。変数 x, y および関数 $f(x, y)$ は τ の関数として、

$$\begin{cases} x = x(\tau) \\ y = y(\tau) \end{cases} \quad f(x, y) = f[x(\tau), y(\tau)]$$

と書かれる。連立常微分方程式

$$\frac{dx}{d\tau} = Q(x, y) \quad \frac{dy}{d\tau} = R(x, y)$$

を解くことによって, xy 面上の trajectory $[x(\tau), y(\tau)]$ が得られる。この trajectory から Callan-Symanzik 形の解

$$f(x, y) \simeq F(x, y) = e^{\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau P[x(\tau), y(\tau)]}$$

が求まる。これは計算機で簡単にプログラムができ, 従って $Z(z)$ の評価が得られる。

上の非線型方程式はくりこみ群の recursion relation と考えてよいから, 我々は級数展開を用いて, くりこみ群の recursion relation を近似的に得る方法を見出したことになる。

この方法が, 実際にどのように適用されるかをみるために, ひとつの具体的な例題を考えてみよう。

fcc 格子の非等方的 Heisenberg 模型を考える。最近接相互作用 $J_{\perp} = J_{xx} = J_{yy} \geq 0$, $J_{\parallel} = J_{zz} \geq 0$ として, ハミルトニアンは,

$$-\frac{H}{kT} = \sum_{\langle i, j \rangle} K_{\parallel} S_i^z S_j^z + \sum_{\langle i, j \rangle} K_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$$

である。ここで変数 $x = K_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{kT}$, $y = K_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{kT}$ を選ぶ。 $x = y$ のとき, 等方的 Heisenberg 模型となり, $x \gg y$ のとき Ising 模型に, $x \ll y$ のとき XY 模型になり, このハミルトニアンは, Ising-Heisenberg-XY crossover を記述するものと考えられる。

xy 平面でみると, 臨界現象は x 軸上で Ising 型に, y 軸上で XY 型に, 直線 $y = x$ 上で Heisenberg 型になる。臨界線は臨界点 (x_c, y_c) から Ising の点 $(x_I, 0)$ へむかって一本と, XY の点 $(0, y_{XY})$ へむかって一本とが, それぞれの軸に垂直に交わる。scaling axis の傾きは, 対称性の考察から $e_1 = 1$, $e_2 = -\frac{1}{2}$ である。

一変数の級数展開の方法によって, Heisenberg 型臨界指数が $r \simeq 1.38 \pm 0.02$, $\phi \simeq 1.25 \pm 0.02$ であることがわかっている。また Ising 型の臨界指数 $r_I = 1.25$, XY 型の臨界指数 $r_{XY} = 1.31$ もわかっている。Pfeuty と Jasnow と私は, 一変数の

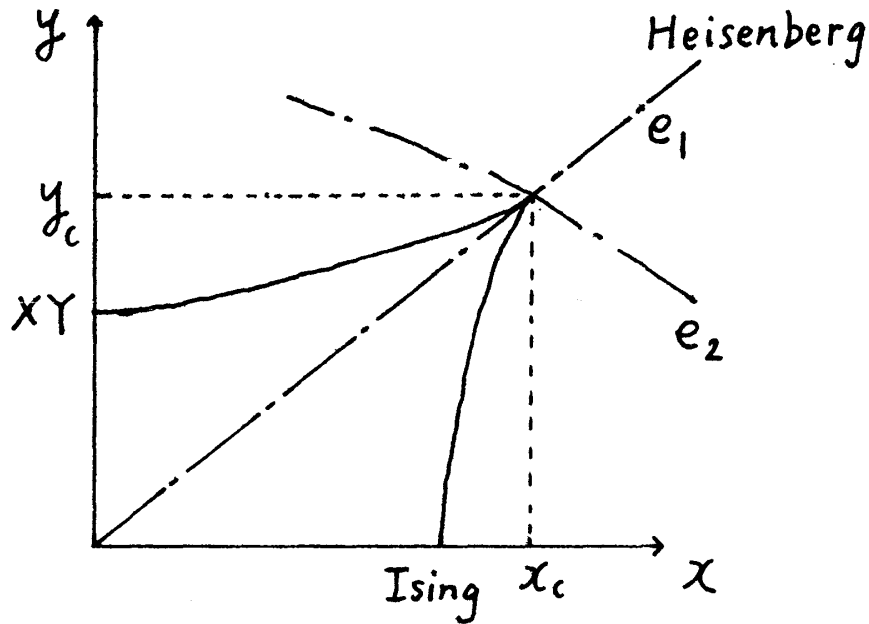


図 11

方法を使って (x_c, y_c) 付近の臨界線を描こうとしたが、大変困難であることがわかった。

そこで上の値を用いず、二変数の級数展開だけを用いて、 $P(x, y)$, $Q(x, y)$, $R(x, y)$ を、いろんな形の領域 $\mathbf{L}(L=13)$, $\mathbf{M}(M=12)$, $\mathbf{N}(N=12)$ について、PQR approximant $[13, 12, 12]$ を計算した。それに応じて、共通零点 $Q(x, y)=0$ $R(x, y)=0$ から、臨界点の評価 $(x_0, y_0) \simeq (0.3148, 0.3151)$ が得られた。臨界指数は $r \simeq 1.398$, $\phi \simeq 1.282$, scaling axis の傾きは $e_1 \simeq 1.07$, $e_2 \simeq -0.405$ という評価が得られた。

臨界線は trajectory の方法を用いて描くと図12のようになり、典型的な二重臨界 cusp を描く。この形は ϕ の値で決まり、一変数の方法では大変困難な点である。

PQR approximant は、特異点が多重構造をもつとき、二変数の級数展開から得られる強力な方法であり、数値的な結果も与えることができる。

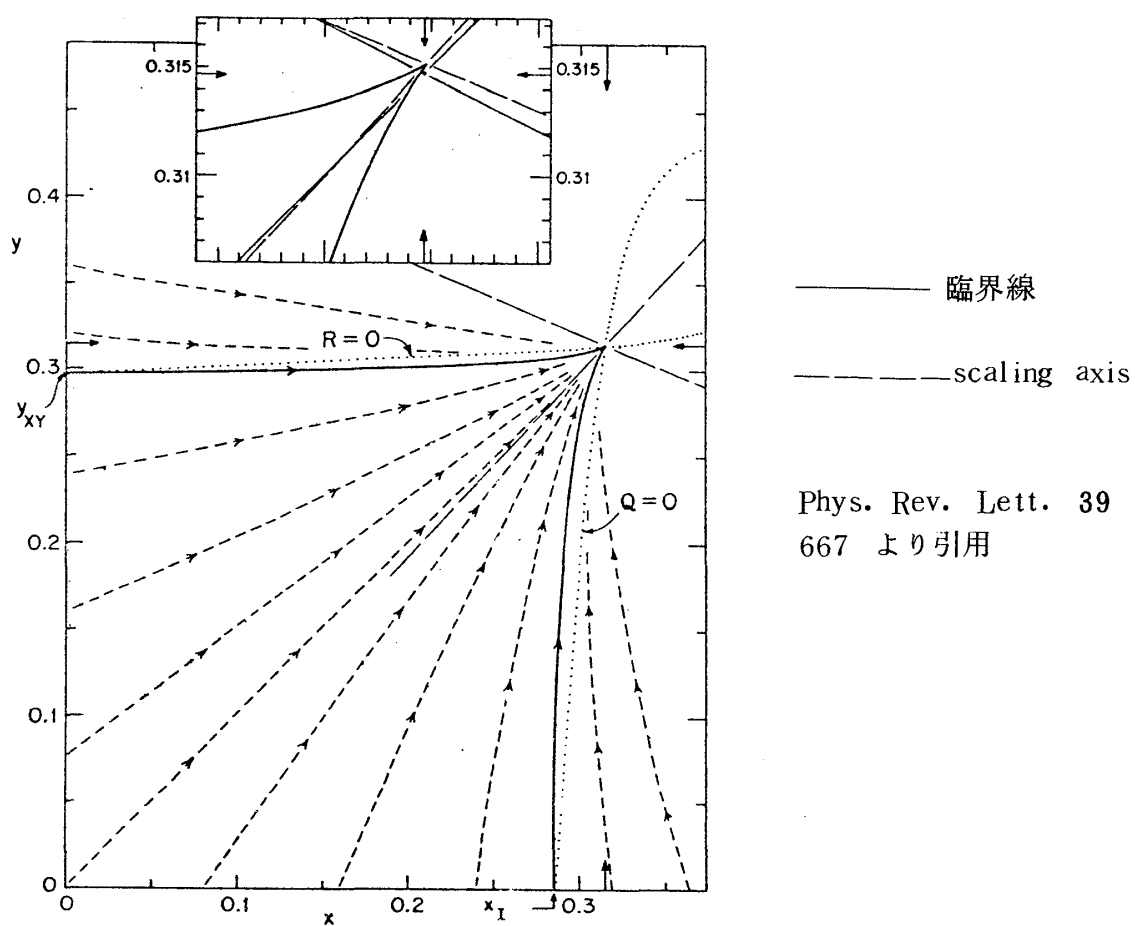


図 12

(以上は、1977年7月20日 基研において行われた講義をまとめたものである。)

文責 後藤 章